

# 密度行列法を用いた GaN 系 2 ウェル THz-QCL 構造の最適化

## Density-matrix model applied to GaN-based two-well THz-QCLs

情報通信研究機構 安田 浩朗

NICT, Hiroaki Yasuda

E-mail: yasuda@nict.go.jp

GaN 系 THz-QCL は、GaAs 系 QCL が発振しない周波数領域 (5–12 THz) の光源として有望である。非平衡グリーン関数法計算によると、GaN 系 THz-QCL では電子・LO フォノン相互作用が大きいのでレーザ準位のブロードニングが生じ発振が困難だが[1]、2 ウェル構造にするとレーザ上準位と下準位間の空間的な重なり合いが減り、利得が得られる[2]。実際に 2 ウェル構造を用いることで GaN 系 THz-QCL のレーザ発振が実現した[3]。GaN/AlGaIn 界面における大きな分極が伝導帯プロファイルに影響を与えるため、所望の周波数で発振する QCL 構造の設計は容易ではない。今回密度行列法で利得を計算し、最適構造を滑降シプレックス法で得るプログラムを作成した。

密度行列の運動方程式は、QCL 構造をモジュールに分割して波動関数を求め、同一モジュール内の状態間は電子の散乱により、異なるモジュールの状態間はトンネリングにより結合するとした。ブロードニングの影響は考慮していない。電流変動から複素誘電率を求めてテラヘルツ帯の利得を計算した。計算の高速化を実現するため、波動関数の計算と密度行列法計算を並列化した。

まず、バリアの Al 比率为 12%、4 個のバリア・ウェルの厚さを格子間隔の整数倍として総当たりで密度行列計算を行った。図 1(a)は、5 THz での利得を表す。上位の構造では利得が最大となる周波数も 5 THz となっている。Al 比率为 18%として同様の計算を行い、各々から 3 構造を選び初期シプレックスの頂点とした (図 1(b)の Vertex 1–6)。バリア・ウェル厚および Al 比率为最適化するパラメータとし滑降シプレックス法計算を行った。図 1(b)は、各パラメータの変化を示す。本プログラムは、設計の効率化、THz-QCL の高性能化の有力なツールになりうる。

[1] H. Yasuda et al., J. Appl. Phys. 111, 083105 (2012). [2] H. Yasuda et al., CLEO 2012 Technical Digest, JW2A.91. [3] W. Terashima et al., IWN2014.

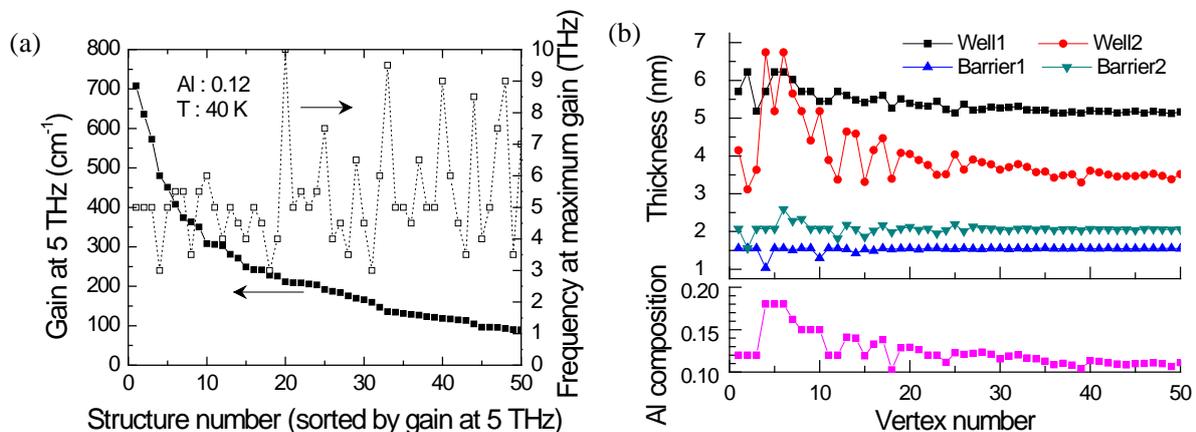


図 1: (a) 密度行列法計算結果。 (b) 滑降シプレックス法による 2 ウェル QCL 構造の最適化